

doi: 10.3969/j.issn.2095-1744.2021.01.008

纳米单晶铜磨料磨损的分子动力学研究

杜 华¹, 杨龙龙², 于紫舒², 吴冰洁¹, 张亚楠², 孙 琨², 方 亮²

(1. 中国核动力研究设计院, 核反应堆系统设计技术重点实验室, 成都 610014;
2. 西安交通大学金属材料国家重点实验室, 西安 710049)

摘 要: 使用开源分子动力学模拟软件, 建立了单晶铜三体磨料磨损的分子动力学模型, 模拟不同水膜厚度和载荷下单晶铜三体磨料磨损的过程, 分析了在水膜厚度和载荷对单晶铜基体磨料磨损的磨损机制和磨损率。结果表明: 无水膜时, 磨料直接压入单晶铜基体, 随着载荷的增大, 基体被磨损的铜原子大幅度增加。在一定载荷下, 由于水膜具有优异的承载和润滑作用, 随着水膜厚度的增大, 单晶铜基体磨损率减小。在一定水膜厚度下, 随着载荷的增大, 磨料压穿水膜与基体直接接触, 且磨料与基体间的作用力随载荷增大而增大, 故基体的磨损率增大。

关键词: 分子动力学模拟; 单晶铜; 磨损机制; 磨损率

中图分类号: TB303 **文献标志码:** A **文章编号:** 2095-1744(2021)01-0050-06

Molecular Dynamics Study of Nano-single Crystal Copper Abrasive Wear

DU Hua¹, YANG Longlong², YU Zishu², WU Bingjie¹, ZHANG Yanan², SUN Kun², FANG Liang²

(1. Key Laboratory of Nuclear Reactor System Design Technology, Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610014, China;
2. State Key Laboratory of Metal Materials, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: A single crystal copper three-body abrasive wear molecular dynamics model is established to simulate the process of single-crystal copper three-body abrasive wear with different water film thicknesses and loads by the open source molecular dynamics simulation software. The wear mechanism and wear rate of the load on the abrasive wear of the single crystal copper matrix are analyzed. The results show that when there is no water film, the abrasive is directly pressed into the single crystal copper matrix. As the load increases, the copper atoms worn by the matrix increase greatly. Under a certain load, due to the excellent bearing and lubrication effect of the water film, as the thickness of the water film increases, the wear rate of the single crystal copper matrix decreases. At a certain thickness of the water film, as the load increases, the abrasive presses through the water film and contacts directly with the substrate, and the force between the abrasive and the substrate increases as the load increases, so the wear rate of the substrate increases.

Key words: molecular dynamics simulation; single crystal copper; wear mechanism; wear rate

纳米薄膜是微机电系统(Micro-electro mechanical systems, MEMS)纳米器件、超大规模集成电路的基本构筑材料之一^[1]。相比于宏观材料的摩擦磨损失效形式, 纳米薄膜材料的磨料磨损具有明显的尺度

效应^[2-3], 这也成为 MEMS 器件革新进程中的重大难点问题之一, 也是纳米科学技术研究领域的热点问题。磨料磨损是指物体表面与硬质颗粒或硬质凸出物(包括硬金属)相互摩擦引起表面材料损失的现

收稿日期: 2020-05-19

作者简介: 杜 华(1983—), 男, 硕士研究生, 主要从事结构材料研究。

引用格式: 杜 华, 杨龙龙, 于紫舒, 等. 纳米单晶铜磨料磨损的分子动力学研究[J]. 有色金属工程, 2021, 11(1): 50-55.

DU Hua, YANG Longlong, YU Zishu, et al. Molecular Dynamics Study of Nano-single Crystal Copper Abrasive Wear[J]. Nonferrous Metals Engineering, 2021, 11(1): 50-55.

象,在该过程中磨料颗粒在材料表层甚至亚表层形成犁沟和切削等不同的损伤^[4-5]。磨料磨损是工业生产上最常见的一种材料接触损伤形式,亦是 MEMS 摩擦磨损中最常见的磨损机制。磨料磨损的影响因素很多,例如材料本身性质、服役条件、磨料颗粒性能等^[6-8]。其中,服役条件是 MEMS 磨料磨损的重要因素。

近年来,随着纳米实验室技术和观测手段的迅猛发展, MEMS 中磨损研究取得了大幅进展。李晓颖等^[9]介绍了微机械电子系统的概念,分析了微机电系统的摩擦磨损机理,结合近年的研究成果,根据微机电与传统机械摩擦磨损的不同,总结出了微机电电子系统摩擦磨损设计中的研究方向。冯辰等^[10]针对 MEMS 微观摩擦磨损研究所需要的实验仪器 STM、AFM、FFM 等探针类实验装置以及球-盘式、销-盘式、针-盘式和微轴承式摩擦副的微摩擦磨损实验装置进行了概述,并根据 MEMS 技术的发展现状,对微观摩擦磨损实验仪器的发展趋势进行了展望。ZHU 等^[11]基于原子力显微镜(AFM)的使用金刚石工具对铜进行纳米切割的过程进行了 MD 模拟,研究了刀具几何形状、切削深度、切削速度和整体温度的影响,发现刀具的几何形状对切削阻力具有显著影响。LI 等^[12]研究了单晶铜在金刚石尖端的纳米高速磨削下亚表层损伤和材料去除的机理,发现磨损速度和切削深度的增加会引起单晶铜的磨屑体积和表面温度增大,较低的磨削速度会产生更多的固有堆垛层错,还发现变形机制的转变取决于位错和变形孪生之间的竞争。

在宏观尺度下,科研工作者已经建立了较为系统的研究方法和实验基础,能够通过力学性能测试来研究影响材料摩擦磨损行为的因素,进而揭示其作用机理。但是在纳米尺度下,由于研究对象的精细化和小型化,导致宏观理论和研究方法可能不再适用。单晶铜具有优良的导电性、导热性而作为 MEMS 系统的重要组成部分。本文采用大规模分子动力学模拟方法,就 MEMS 中纳米单晶铜在润湿条件下的磨料磨损行为进行研究,期望能揭示摩擦磨损行为和微观作用机理,弥补试验的不足,为 MEMS 的发展应用提供参考。

1 理论模型

图 1 为含水膜单晶铜三体磨料磨损分子动力学模型,由上单晶铜基体、磨料和下单晶铜基体三部分组成。将单晶铜基体划分为牛顿层,恒温层和固定

层,牛顿层原子的运动遵循牛顿第二定律,用于研究材料磨损机理和规律;恒温层通常采用 Nosé-Hoover 热浴方法控制整个模型的温度恒定在 300 K,用于基体间原子的热传递;固定层是为了防止模拟过程中模型的偏移以及减小边界作用,不参与实际的计算过程。用 Tersoff 势函数描述金刚石磨料的相互作用^[13];用 EAM 势来描述铜原子之间的相互作用^[14];用 Morse 势来描述铜原子与碳原子之间相互作用,其势能参数 $D_0 = 0.087$ eV, $\alpha = 51.41$ nm, $\gamma_0 = 0.205$ nm^[15];水分子采用 TIP4P 模型^[16],用 LenNard-Jones 势函数描述氧原子与铜原子及碳原子之间相互作用^[17],其具体势能参数如表 1 所示。

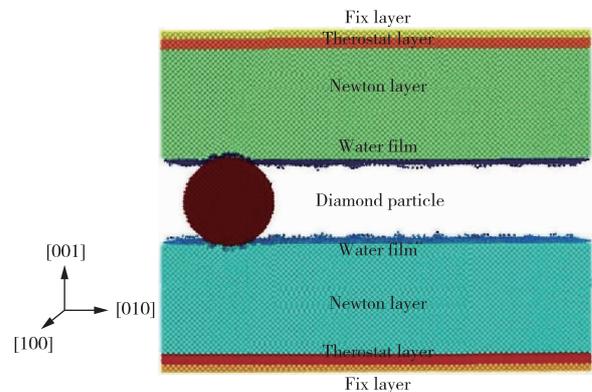


图 1 含水膜单晶铜三体磨料磨损分子动力学模型
Fig. 1 Molecular dynamics model of single-crystal copper tri-body abrasive wear of aqueous film

表 1 LenNard-Jones 势能参数

Interaction-atom pair	$\epsilon / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	δ / nm
O—O	0.774 90	0.315 89
C—O	0.478 50	0.327 50
Cu—O	3.8	0.246 70

本文中的 MD 模拟在大规模分子动力学模拟软件 LAMMPS 中展开。速度积分采用 Velocity-Verlet 算法^[18],时间步长采用 1 fs, x 和 z 方向采用周期性边界,在 NVT 系综下驰豫 100 ps。模拟磨损的过程是上、下单晶铜基体在 y 方向上以一定的载荷相对运动达到平衡之后,下基体沿 y 正方向,上基体沿 y 负方向滑动。模拟结果在 Ovito 软件^[19]中实现可视化。

2 结果与分析

在三体磨料磨损过程中,磨料的驱动力是单晶铜基体和磨料之间的相互作用,材料的磨损主要是

依靠磨料与基体之间的摩擦力里作用。因此进行了在不同水膜厚度和外载荷下,三体接触摩擦磨损的分子动力学模拟,进而讨论磨料磨损过程中单晶铜基体的磨损机制和磨损率的规律。

2.1 单晶铜的磨损机制

图 2 是载荷分别为 40 和 60 nN、基体滑动速度 25 m/s、滑动距离为 20 nm 条件下,无水膜磨损过程构型。由图 2(c)和(d)可知,在无水膜条

件下,磨料压入单晶铜基体然后发生滑动摩擦磨损,会在单晶铜基体表面留下一道很明显的划痕,在磨料与基体之间的铜原子在切向力作用下被磨损,发生了多层原子的磨损,且外载荷越大基体磨损的越严重,被磨损的原子越多。无水膜条件下单晶铜基体磨料磨损的划痕两侧有较多的磨损铜原子,磨料前方的磨损铜原子较少,材料以犁沟的形式被磨损。

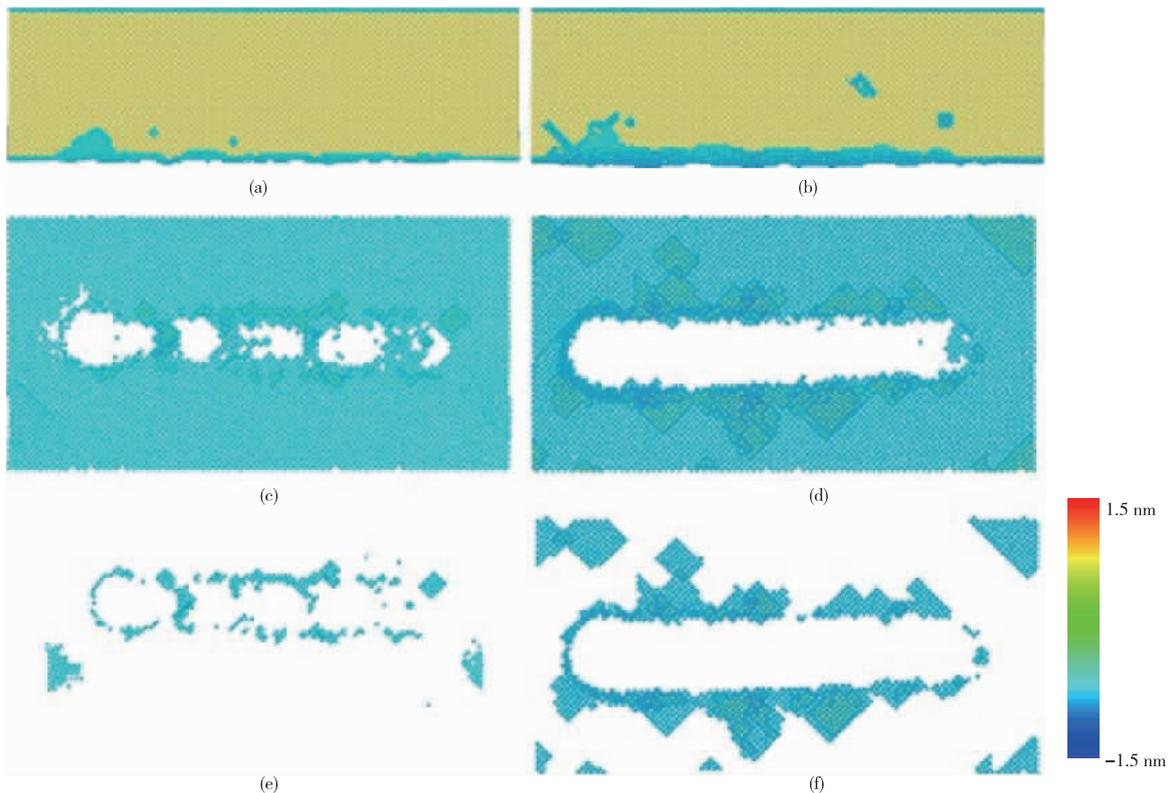


图 2 无水膜材料磨损构型:(a)载荷 40 nN 下单晶铜的纵截面;(b)载荷 60 nN 下单晶铜的纵截面;(c)载荷 40 nN 下单晶铜的磨损表面;(d)载荷 60 nN 下单晶铜的磨损表面(e)载荷 40 nN 下磨损原子的形貌;(f)载荷 60 nN 下磨损原子的形貌

Fig. 2 Abrasion configuration of anhydrous membrane materials; Longitudinal section of single crystal copper under (a) 40 nN load; (b) 60 nN load; Wear surface of single crystal copper under (c) 40 nN load; (d) 60 nN; Load Morphology of worn atoms (e) under 40 nN load; (f) under 60 nN load

表 2 是不同条件下水膜、磨料、单晶铜基体之间的相互作用力。由表 2 可知,载荷为 40 nN、水膜厚度为 0.5 nm 时,水膜与单晶铜基体之间的相互作用力为 38.38 nN,水膜与磨料之间的相互作用力为 13.43 nN,磨料与基体之间的相互作用力为 1.88 nN。在这种条件下,磨料压入单晶铜基体,使基体发生弹塑性变形。随着磨料与基体间的相对运动,磨料与基体之间发生剪切作用。在剪切作用下,

单晶铜基体发生弹性变形和塑性变形。当作用于基体表面的机械能足以破坏铜原子间的金属键后,铜原子就会脱离基体表面,进而被磨损去除。水膜厚度为 0.5 nm 不变,载荷变从 40 变为 60、80、100 nN,磨料与基体间的相互作用力则从 1.88 变为 5.93、20.03、35.33 nN,即随着载荷的增加,磨料与铜原子之间的粘附作用增强,因而磨损的原子数目增多且划痕区域增大。

表 2 不同条件下水膜、磨料、单晶铜之间的相互作用力

Table 2 Interaction forces between water film, abrasive and single crystal copper under different conditions

Water film thickness/nm	External load/nN	Force between water film and substrate /nN	Force between water film and abrasive /nN	Force between abrasive and substrate /nN
0.3	40	20.18	10.89	2.97
	60	11.87	13.66	10.09
	80	13.44	15.87	24.01
	100	11.53	13.82	39.56
0.5	40	38.38	13.43	1.88
	60	33.97	20.09	5.93
	80	30.11	21.41	20.03
	100	25.63	21.82	35.33
1	40	46.22	20.23	0.85
	60	49.85	31.84	2.56
	80	43.73	44.24	7.07
	100	35.32	41.08	20.96

图 3 是水膜厚度 0.5 nm 时, 载荷为 40 和 60 nN、基体滑动速度 25 m/s、滑动距离为 20 nm, 材料磨料磨损过程构型, 图 3 中黄色的原子为单晶铜表面以下原子, 单晶铜表面及其以上原子根据位移值着色。由图 3 可知, 当载荷为 40 nN、水膜厚度为 0.5 nm 时, 磨料并未压穿水膜与单晶铜基体直接接触, 但是从单晶铜的纵截面可以看出已经有铜原子被磨损。图 4 为水膜厚度 0.5 nm 时, 载荷为 40 和 60 nN、基体滑动速

度 25 m/s、滑动距离为 20 nm, 上基体内部瞬时缺陷。由图 4 可见, 当载荷为 40 nN、水膜厚度为 0.5 nm 时, 单晶铜基体在模拟过程中, 基体内没有出现非晶态和损伤层的出现, 这一现象的发现可为单晶铜在抛光过程中实现有序化的表面提供理论支持。随着载荷的增加, 当载荷为 60 nN 时, 磨料压穿水膜与单晶铜基体直接接触, 基体内部则会出现非晶态和损伤层。但是由于水膜的影响, 被磨损的铜原子呈散乱分布。

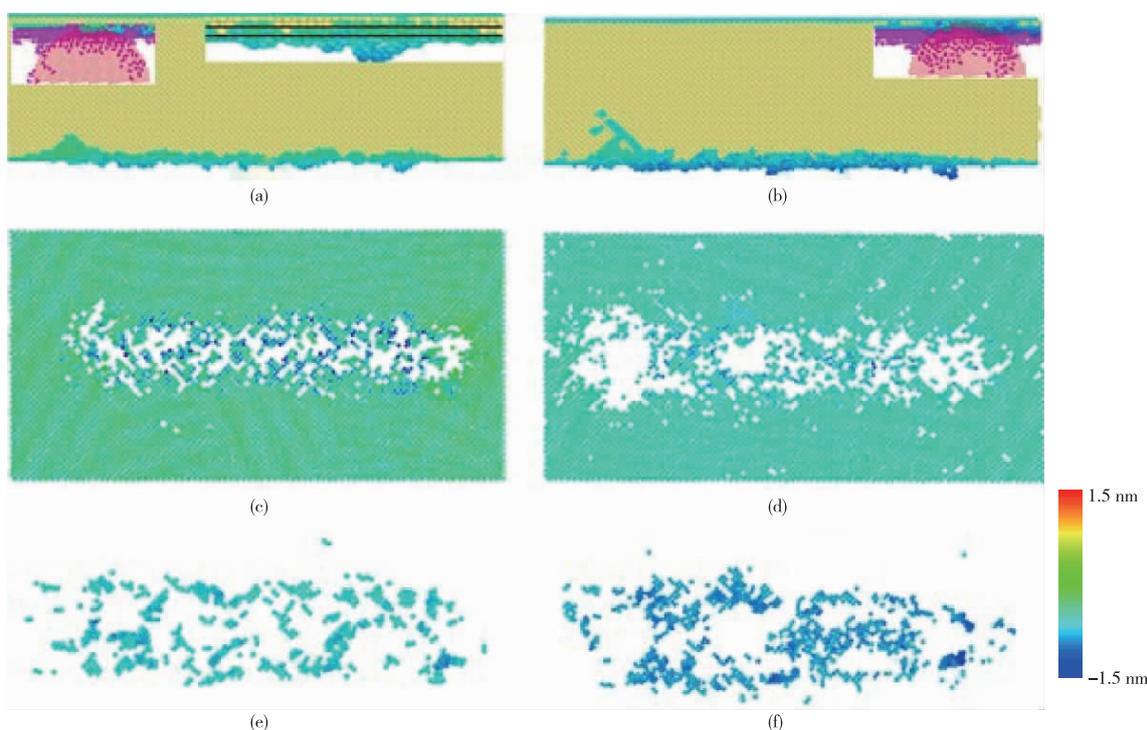


图 3 含水膜材料磨料磨损构型图:(a)载荷 40 nN 单晶铜的纵截面;(b)载荷 60 nN 单晶铜的纵截面;(c)载荷 40 nN 单晶铜磨损表面;(d)载荷 60 nN 单晶铜磨损表面;(e)载荷 40 nN 磨损原子的形貌;(f)载荷 60 nN 磨损原子的形貌

Fig. 3 Abrasive wear configuration diagram of water-containing membrane material; Longitudinal section of single crystal copper (a) 40 nN load; (b) 60 nN load; Single crystal copper wear surface (c) 40 nN load; (d) 60 nN load; Wear morphology (e) 40 nN load; (f) 60 nN load

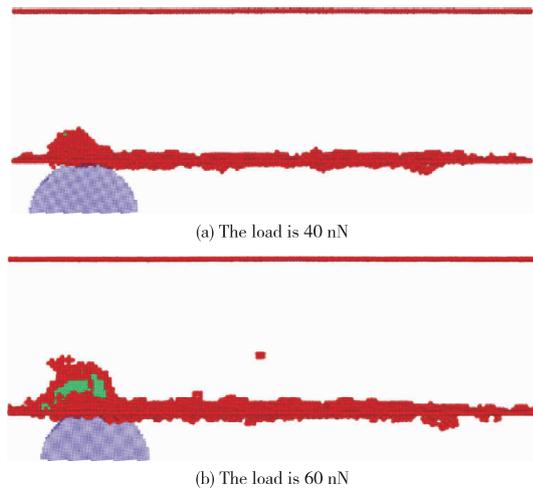


图 4 上基体内部瞬时缺陷

Fig. 4 Transient defects in the upper substrate

2.2 单晶铜的磨损率

图 5 为不同载荷条件下,单晶铜原子的磨损数目随水膜厚度变化的曲线。计算结果表明,在水膜厚度一定的条件下,随着载荷的增加,材料的磨损率大幅度增大。这是由于载荷越大,磨料压入基体的深度越深,在磨料的作用下产生更多的脱离原位置的单晶铜原子。随着磨料的运动,一部分铜原子发生弹性回复,恢复到原来的位置;一部分铜原子脱离基体表面,形成不定形原子,分散在磨痕两侧或者集中在磨料前端。在载荷一定的条件下,无水膜的磨损率远大于有水膜的磨损率,且随着水膜厚度的增大,单晶铜的磨损率减小,水膜的存在减小了单晶铜的磨损率。这是由于水膜具有良好的承载和润滑作用,水膜的存在一方面承载了一部分压力,减少了单晶铜基体和磨料之间的直接相互作用力,一定程度

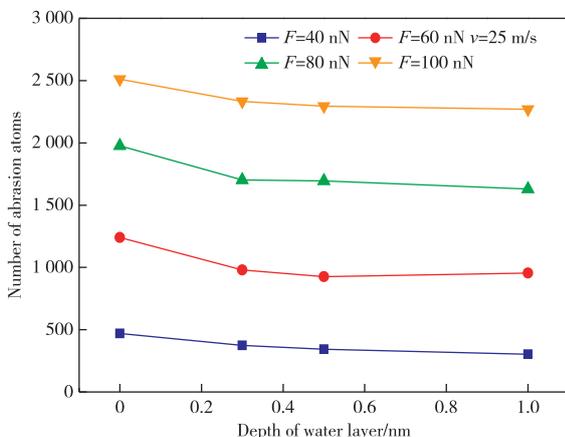


图 5 不同载荷下的原子磨损数-水膜厚度曲线

Fig. 5 Atomic de-abrasion number-water film thickness curves under different loads

上减小了磨料作用在单晶铜基体上的力。另一方面水膜的润滑作用减小了单晶铜和磨料之间的摩擦系数,使材料磨损铜原子数目减少。

3 结论

以纳米单晶铜材料为研究对象,采用大规模分子动力学模拟和理论分析方法,研究了在不同水膜厚度和载荷下,纳米单晶铜磨料磨损的磨损机制和磨损率,得到以下结论:

1) 在无水膜条件下,单晶铜基体磨料磨损的划痕两侧有较多的磨损铜原子,磨料前方的磨损铜原子较少,材料以犁沟的形式被磨损。

2) 相同条件水膜厚度下,随着载荷的增加,磨料压入基体的深度增加,单晶铜基体被磨损的铜原子数目增多,材料的磨损率增大。

3) 相同载荷条件下,由于水膜良好的润滑作用,承担了大部分的力,磨料对基体的相互作用力较小,单晶铜被磨损的铜原子数目减少,材料的磨损率减小。

参考文献:

- [1] 宋宇,张海霞. 微电子机械系统研究领域的最新进展——IEEE MEMS 2018 国际会议综述[J]. 太赫兹科学与电子信息学报,2018,16(2):372-378.
SONG Yu,ZHANG Haixia. The latest progress in the research field of micro-electro mechanical systems——A summary of the IEEE MEMS 2018 International Conference [J]. Terahertz Science and Electronic Information Journal,2018,16(2):372-378.
- [2] 杨晓京,刘宁,余证,等. 纳米压痕条件下单晶锗的尺寸效应[J]. 有色金属工程,2019,9(4):8-13.
YANG Xiaojing,LIU Ning,YU Zheng,et al. Size effect of single crystal germanium under nanoindentation conditions[J]. Nonferrous Metals Engineering,2019,9(4):8-13.
- [3] 徐爽,郭雅芳. 纳米铜薄膜尺度效应的分子动力学研究[C]// 北京力学学会第 15 届学术年会论文摘要集,北京,2009.
XU Shuang,GUO Yafang. Molecular dynamics study on the scale effect of nano-copper thin films [C] // Abstracts of papers of the 15th academic annual meeting of Beijing Society of Mechanics,Beijing,2009.
- [4] 关成君,陈再良. 机械产品的磨损——磨料磨损失效分析[J]. 理化检验:物理分册,2006(1):53-57.
GUAN Chengjun,CHEN Zailiang. Wear of mechanical products——Analysis of abrasive wear failure [J]. Physical and chemical inspection: physical volume,

- 2006(1):53-57.
- [5] 材料耐磨抗蚀及其表面技术丛书编委会. 材料的磨料磨损[M]. 北京:机械工业出版社,1990.
Editorial Committee of Materials Wear Resistant Corrosion and Surface Technology Series. Abrasive wear of materials [M]. Beijing: Machinery Industry Press,1990.
- [6] LEE A P, PISANO A P, LIN L. Normal and tangential impact in micro electromechanical structures [C]// Micro Electro Mechanical Systems, Mems 91, An Investigation of Micro Structures, Sensors, Actuators, Machines & Robots IEEE,1991.
- [7] SRIRAM S, BHARAT B. Micro/nanotribological studies of polysilicon and SiC films for MEMS applications[J]. Wear,1998,217(2):251-261.
- [8] FANG L, ZHAO J, LI B, SUN K. Movement patterns of ellipsoidal particle in abrasive flow machining[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2009, 209(20):6048-6056.
- [9] 李晓颖,韩彦彬. 微机械电子系统中的摩擦磨损及研究方向[J]. 现代机械,2006(3):82-83.
LI Xiaoying, HAN Yanbin. Friction and wear in micromechanical electronic systems and research directions[J]. Modern Machinery,2006(3):82-83.
- [10] 冯辰,刘同冈,商金玮,等. MEMS微摩擦磨损仪器的研究进展[J]. 微纳电子技术,2016,53(8):520-526.
FENG Chen, LIU Tonggang, SHANG Jinwei, et al. Research progress of MEMS micro-friction and wear instruments[J]. Micro/Nano Electronic Technology, 2016,53(8):520-526.
- [11] ZHU P Z, HUY Z, MAT B, et al. Study of AFM-based nanometric cutting process using molecular dynamics[J]. Applied Surface Science,2010,256(23):7160-7165.
- [12] LI J, FANG Q H, LIU Y W, et al. A molecular dynamics investigation into the mechanisms of subsurface damage and material removal of monocrystalline copper subjected to nanoscale high speed grinding[J]. Applied Surface Science,2014,303:331-343.
- [13] 周耐根,洪涛,周浪. MEAM势与 Tersoff势比较研究——碳化硅熔化与凝固行为[J]. 物理学报,2012,61(2):479-486.
ZHOU Naigen, HONG Tao, ZHOU Lang. A comparative study of MEAM potential and Tersoff potential——Silicon carbide melting and solidification behavior[J]. Journal of Physics,2012,61(2):479-486.
- [14] KANG H, ZHANG Y, YANG M. Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of Cu——Arnanofluid using EAM potential for Cu-Cu interactions[J]. Applied Physics A: Materials Science & Processing,2011,103(4):1001-1008.
- [15] 郭文朝. 基于准连续介质力学的单晶铜纳米级切削过程仿真研究[D]. 长春:吉林大学,2012.
GUO Wenchao. Simulation study of nanocrystalline cutting process of single crystal copper based on quasi-continuum mechanics [D]. Changchun: Jilin University,2012.
- [16] FRANCIS Z, INCERTI S, IVANCHENKO V, et al. Monte Carlo simulation of energy-deposit clustering for ions of the same LET in liquid water[J]. Physics in Medicine and Biology,2011,57(1):209-224.
- [17] 于智清,王逊,刘艳侠,等. α -B晶体的 Lennard-Jones对势和对势型多体势构建[J]. 物理学报,2015(10):94-100.
YU Zhiqing, WANG Xun, LIU Yanxia, et al. Construction of Lennard-Jones pair potential and pair potential multi-body potential of α -B crystal[J]. Acta Physica Sinica,2015(10):94-100.
- [18] PALMER B J. Direct application of shake to the velocity verlet algorithm[J]. Journal of Computational Physics,1993,104(2):470-472.
- [19] STUKOWSKI, ALESANDER. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO——The open visualization tool [J]. Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering, 2010, 18(1):015012. DOI:10.1088/0965-0393/18/1/015012.